数値計算

京都大学大学院情報学研究科
大木 健太郎
連絡先： ohki@i.kyoto-u.ac.jp

第2回

- ノルム
- 連立一次方程式の誤差

本日の内容

- ❖誤差の評価: ノルムによる誤差の見積もり
- ❖連立一次方程式の誤差

記法

- 実数の全体: $\mathbb{R}$
- 複素数の全体: $\mathbb{C}$
- $n \times m$ 次元 の実･複素行列の全体: $\mathbb{R}^{n\times m}$, $\mathbb{C}^{n\times m}$

誤差

- 数字の誤差（丸め誤差，打切り誤差，桁落ち）
  - 誤差評価

$$|x - x_R| \leq \frac{1}{2}|x|N^{1-t}$$

N 進 t 桁の浮動小数点数

$$+.d_1 \cdots d_t \times N^q$$

- 方程式の誤差（一次元の場合）

$$a \times x = b \ \Rightarrow \ a_R \times x_R = b_R$$

浮動小数点数

$$a_R = a + \underline{\Delta a}, \ b_R = b + \underline{\Delta b}, \ x = x_R + \underline{\Delta x}$$

誤差

数値計算と誤差

- 数値計算には誤差が付きもの
  - 誤差の評価のない数値計算結果は信用できない場合がある

（例）

$$(a-b)^2 \geq 0 \;\Leftrightarrow\; a^2+b^2 \geq 2ab,\ \forall a, b \in \mathbb{R}$$

$$a = 2.0338,\ b = 2.0406$$

10 進 5 桁の浮動小数点数

$$\Rightarrow \begin{cases} a^2 \approx 4.1367,\ b^2 \approx 4.1640,\ 2ab \approx 8.3008, \\ a^2 + b^2 \approx 8.3007 \end{cases}$$

$$\Rightarrow a^2 + b^2 < 2ab$$

成り立たないハズの結果が返ってくる

誤差の評価方法(スカラー)

$$
\begin{aligned}
&(a+\Delta a)(x+\Delta x)-(b+\Delta b)\\
&=\underbrace{ax-b}_{=0}+(a+\Delta a)\Delta x+\Delta a x-\Delta b\\
&=(a+\Delta a)\Delta x+\Delta a x-\Delta b=0
\end{aligned}
$$

$a+\Delta a\neq 0$ ⇒ $\left|\frac{\Delta x}{x}\right|\leq\left|\frac{a}{a+\Delta a}\right|\left(\left|\frac{\Delta a}{a}\right|+\left|\frac{\Delta b}{ax}\right|\right)$

$\left|\frac{\Delta a}{a}\right|<1$ ⇒ $\leq\frac{1}{1-|\Delta a/a|}\left(\left|\frac{\Delta a}{a}\right|+\left|\frac{\Delta b}{b}\right|\right)$

十分大きな桁数の
浮動小数点数を
用いれば達成する

相対誤差の形でまとめられる

誤差の評価：連立一次方程式

$$Ax = b,\ (A + \Delta A)(x + \Delta x) = (b + \Delta b),$$

$$A, \Delta A \in \mathbb{R}^{n \times n},\ x, b, \Delta x, \Delta b \in \mathbb{R}^n$$

ベクトルになる

- 絶対値の代わりの評価方法が必要
- 絶対値の性質を，ベクトルや行列に一般化

$\Rightarrow$ ノルム（norm）

i. 大きさを評価するので，正の実数で評価できること
ii. 正の定数倍したものの大きさは，大きさの定数倍になること
iii. 足したものの大きさは，それぞれの大きさの和以下になること

ノルム

X ：ベクトル空間（足し算，スカラー倍ができる空間）

（例）実・複素ベクトル空間 $\mathbb{R}^n,\ \mathbb{C}^n,\ \mathbb{R}^{n\times m},\ \mathbb{C}^{n\times m}$

定義

ベクトル空間 X に対し，以下を満たす関数 $\|\bullet\|$ を
ノルム(norm)という.

（ i ）$\forall x \in X,\ \|x\| \geq 0$ かつ $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$

（ ii ）$\forall x \in X,\ \alpha \in \mathbb{C},\ \|\alpha x\| = |\alpha|\|x\|$

（ iii ）$\forall x, y \in X,\ \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

次ページから，よく用いるベクトルノルム，行列ノルムを導入

ベクトルノルムの例

$$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^\top \in \mathbb{C}^n$$ に対して

- 1-ノルム

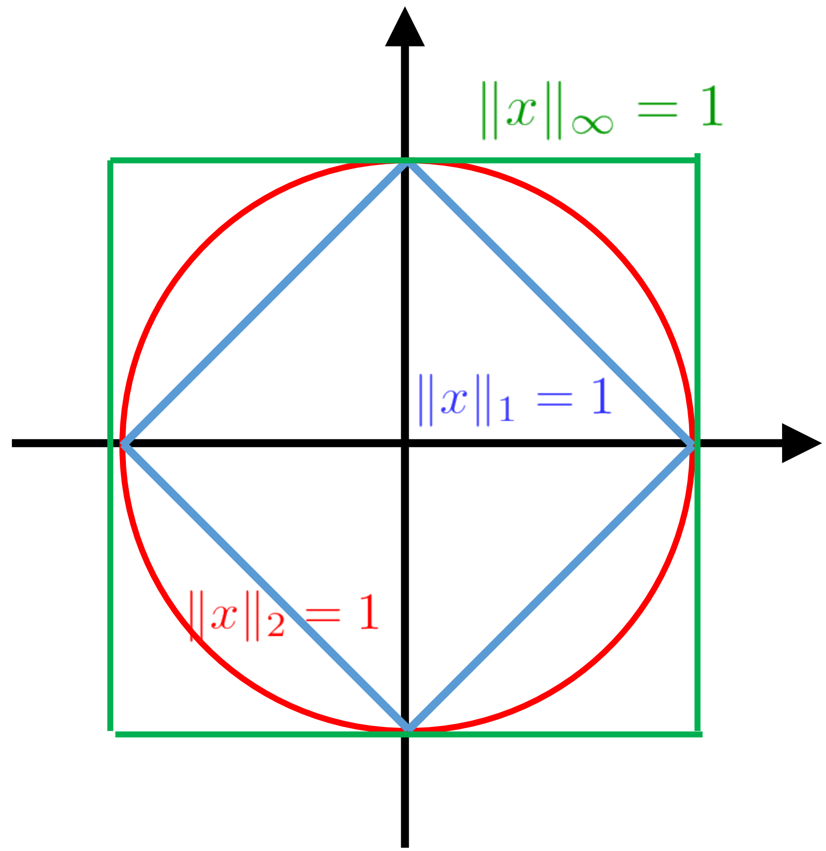
$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

- 2-ノルム（Euclid ノルム）

$$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2}$$

- max-ノルム（一様ノルム，無限大ノルム）

$$\|x\|_\infty = \max_{i=1,2,\cdots,n} \{|x_i|\}$$



ベクトルノルムの性質（1／2）

補題 1.2（連続性）

$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^\top \in \mathbb{C}^n$ に対して
任意のノルムは各成分の連続関数である.

補題 1.3（ノルムの同値性（の準備））

任意のノルムに対して

$$m\|x\|_\infty \leq \|x\| \leq M\|x\|_\infty, \ \forall x \in \mathbb{C}^n$$

を満たす正数 $m, M > 0$ が存在する.

ベクトルノルムの性質（2／2）

定理 1.1（ノルムの同値性）

任意の2つの異なるノルムに対して

$$m\|x\|_\beta \leq \|x\|_\alpha \leq M\|x\|_\beta, \ \forall x \in \mathbb{C}^n$$

を満たす正数 $m, M > 0$ が存在する.

※ $n = \infty$ （無限次元ベクトル空間）では成り立たない

ノルムの同値性の利点：
都合の良い測り方で,
誤差や反復計算の収束性などを評価できる

ベクトルノルムの同値性の例

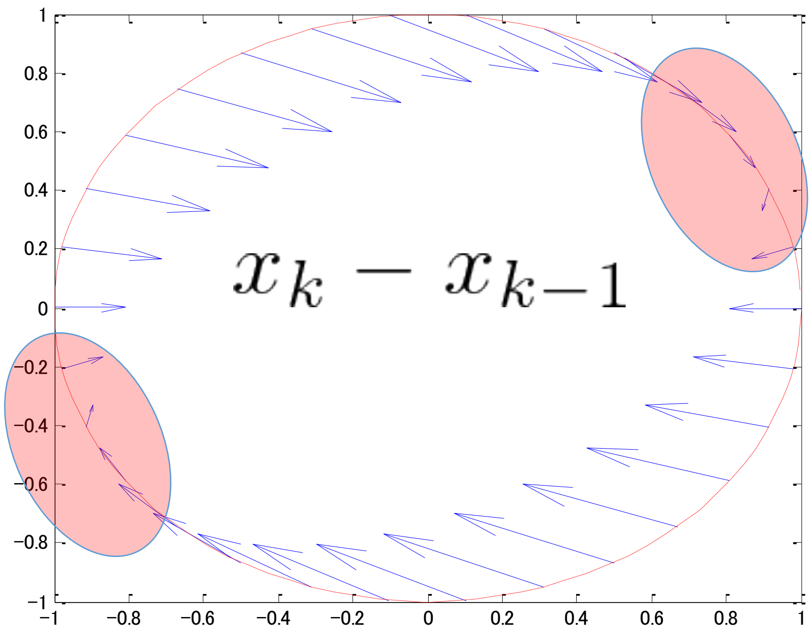
数列

$$x_k = Ax_{k-1},\ \ k = 1, 2, 3, \cdots$$

$$A = \begin{bmatrix} 0.5 & 1 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}$$

$$\|x_k\|_2^2 \le \|x_{k-1}\|_2^2$$

が，いつでも言えるわけではない



Matlab でプロット

ベクトルの位置によっては
小さくならない

ベクトルノルムの同値性の例

$$x_k = Ax_{k-1},\ \ k = 1, 2, 3, \cdots$$

$$A = \begin{bmatrix} 0.5 & 1 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}$$

$$\|x_k\|_P^2 \leq \|x_{k-1}\|_P^2,$$

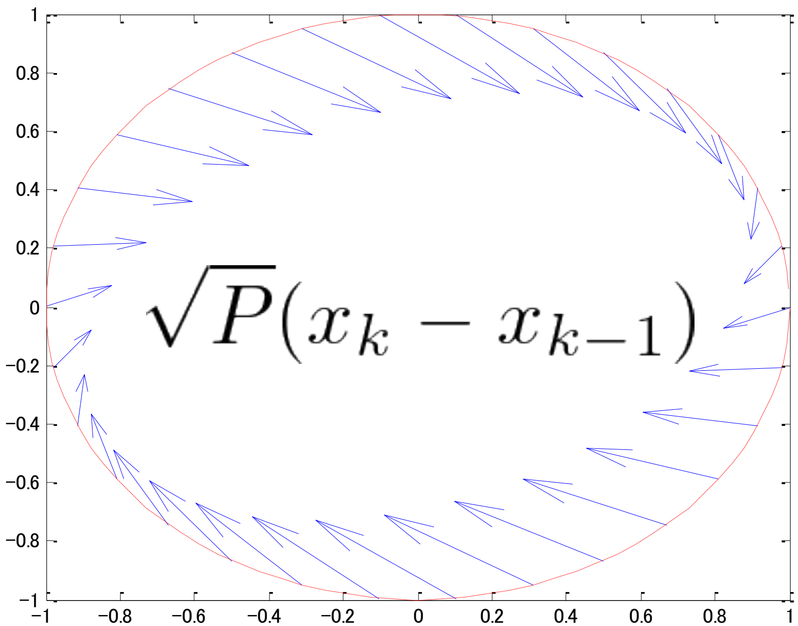
$$\|x\|_P^2 := x^\top P x$$

$$P = A^\top P A + I$$

正定値対称行列解

$$\|x_k - y\|_P \xrightarrow{k \to \infty} 0$$

$$\Leftrightarrow\ \|x_k - y\|_2 \xrightarrow{k \to \infty} 0$$



Matlab でプロット

都合のよいノルムが見つかれば，
収束性の議論がしやすい

行列ノルムの例

$A \in \mathbb{C}^{m \times n}, \ \ x \in \mathbb{C}^n$ に対して

- 誘導ノルム（induced norm）

$$\|A\| = \max_{x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

※ 異なるベクトルノルムでも構わない（ *Ax* と *x* の次元が異なっていても可）
※ *A* が正方行列ならば，同じベクトルノルムを用いる場合が多い

- Frobenius ノルム

$$\|A\|_F = \sqrt{\mathrm{Tr}[A^* A]}$$

トレース
（正方行列の対角和）

※ 教科書では，
（行列の）Euclid ノルムと呼んでいる

誘導ノルムの具体例

$$A = (A_{ij}) \in \mathbb{C}^{n \times n},\ x \in \mathbb{C}^n$$ に対して

- $$\|A\|_1 = \max_{x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}} \frac{\|Ax\|_1}{\|x\|_1} = \max_{j=1,2,\cdots n} \sum_{i=1}^{n} |A_{ij}|$$
- $$\|A\|_\infty = \max_{x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}} \frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty} = \max_{i=1,2,\cdots n} \sum_{j=1}^{n} |A_{ij}|$$
- $$\|A\|_2 = \max_{x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} = \max_{i=1,2,\cdots n} \sqrt{\lambda_i(A^* A)}$$

$\lambda_i(B)$ ：正方行列 *B* の *i* 番目の固有値

誘導ノルムの性質

$A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ に対して

- $\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|$
- $\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$
- $\|I\| = 1$

  単位行列

本日の内容

- ❖誤差の評価: ノルムによる誤差の見積もり
- ❖連立一次方程式の誤差

  - 簡単のために，浮動小数点数表現は考えない
（数値の表現は，いくらでも精度よく行える）
  - 理想的な状況の誤差評価は，浮動小数点を用いた場合の誤差評価の下界を与える

連立一次方程式の誤差

- 厳密解でも，少しの差が大きな違いになりうる

$$Ax_i = b_i,\ \ A = \begin{bmatrix} 0.4 & 1.2 \\ 3.5 & 10.501 \end{bmatrix},$$

$$b_1 = \begin{bmatrix} 5.2 \\ 45.504 \end{bmatrix},\ \ b_2 = \begin{bmatrix} 5.2 \\ 45.501 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad x_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix},\ \ x_2 = \begin{bmatrix} 10 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- 誤差に対する指標：条件数

定義

$A \in \mathbb{C}^{n\times n},\ \det(A) \neq 0$ に対して

$$\kappa(A) = \|A\|\|A^{-1}\|$$

を行列 A の条件数（condition number）という

連立一次方程式の誤差評価

$$Ax = b, \ (A + \Delta A)(x + \Delta x) = (b + \Delta b),$$
$$A, \Delta A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \ x, b, \Delta x, \Delta b \in \mathbb{R}^n$$

定理 1.6

$$\|b\| \neq 0, \ \det(A) \neq 0, \ \|\Delta A\| < \|A\|$$

を満たすならば，次が成り立つ．

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A)\|\Delta A\|/\|A\|} \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right)$$

行列ノルムは，ベクトルノルムに対する誘導ノルム（条件数も同様）

解きにくい方程式と条件数

$$Ax_i = b_i,,\ A = \begin{bmatrix} 0.4 & 1.2 \\ 3.5 & 10.501 \end{bmatrix},\quad b_1 = \begin{bmatrix} 5.2 \\ 45.504 \end{bmatrix},\ b_2 = \begin{bmatrix} 5.2 \\ 45.501 \end{bmatrix}$$

$$x_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix},\ x_2 = \begin{bmatrix} 10 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$b_2 = b_1 + \Delta b,\ x_2 = x_1 + \Delta x,\ b_1 = b,\ x = x_1$$

定理 1.6 より $\dfrac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \dfrac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$

Euclid ノルムの誘導ノルム: $\kappa(A) \simeq 3.1 \times 10^5$

条件数が大きい（条件数が悪い or 悪条件という）

条件数に関して

- 条件数が悪いと，誤差の上界が大きくなる
（誤差が必ずしも大きくなるわけではない）

$$A = \begin{bmatrix} 10000 & 0 \\ 0 & 0.00001 \end{bmatrix}$$

⇨ $\kappa(A) = 10^9$ と大きいが，

$Ax = b$ は2つの1次元の問題

- 条件数の計算には，逆行列の誘導ノルムを見積もる必要がある

X : A の近似逆行列（何らかの方法で得られたとする）

⇨ $R := I - AX$

⇨ $\|R\| < 1$ ならば $\|A^{-1}\| \leq \dfrac{\|X\|}{1 - \|R\|}$

方程式の誤差の下界について

- スカラーの場合

$$\left|\frac{\Delta x}{x}\right| \geq \frac{1}{1+|\Delta a/a|}\left|\left|\frac{\Delta a}{a}\right|-\left|\frac{\Delta b}{b}\right|\right|$$

- 一般次元の場合の評価は難しい

例えば, 次の不等式は成り立つ.

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \geq \frac{1}{1+\|\Delta A\|\|A^{-1}\|}\left|\frac{\|A^{-1}\Delta Ax\|}{\|x\|}-\frac{\|A^{-1}\Delta b\|}{\|x\|}\right|$$

次回の講義予定

- 連立一次方程式の解法
    - Gauss の消去法
    - 反復法